

相対論的チャネリング電子のスピンの偏極

小 山 慶 太

1. はじめに

荷電粒子のチャネリングは、現在物理学だけにとどまらず工学の多くの分野でも広く応用されているが、最近相対論的電子、陽電子（エネルギーは 1 MeV ）からのチャネリング放射が理論的に提唱された⁽¹⁾。これは、チャネリング粒子が結晶内の原子面や軸によってその運動方向を変えるとき、つまり加速度を受けるさいに光が放出される現象である。その後、多くの実験によってチャネリング放射が観測されている⁽²⁾。粒子のエネルギーが高い場合には、きわめて強度の強いX線、 γ 線が放出されることから、放射光を強力なX線、 γ 線源に利用することも期待されている⁽³⁾。光源としてみた場合、強度、指向性、単色性など多くの点でチャネリング放射はシンクロン放射（SOR）や制動放射を凌駕することが予想されるため、この方面での開発が今後多に進むものと考えられる⁽³⁾。一方、粒子のエネルギーが低くなると、量子論的效果が顕著となり、放射は原子面または軸ポテンシャル内の量子化された束縛状態間の遷移に対応する。たとえば、数 MeV の電子をシリコンに軸チャネリングさせ、各遷移に対応する放射スペクトルを観測し、束縛運動の詳しい情報を得る実験が行われている^(4,5)。このとき得られるチャネリング放射光（エネルギーは数 KeV ）は SiKX 線とはほぼ同程度の強度をもち、放射収量の測定値は束縛状態間の双極子近似を用いた計算とよく一致している。なお、束縛状態ができるための条件

は、チャネリング軸に垂直な面内の電子のエネルギー、（横運動の運動エネルギー）+（原子軸からのポテンシャルエネルギー），が負になることである。このようすは，ちょうど結晶内に2次元の原子ができたと考えればよいであろう。

さて，束縛状態間の遷移によって，放射が起きるのならば，反対に軸チャネリング電子に光を吸収させ高いエネルギー状態へ励起することも考えられる。このとき円偏光を用いると，電子は純粹スピン状態に励起され，完全に偏極することが示される。これは，チャネリングに対する *Fano* 効果⁽⁶⁾の応用と考えられるが，今の場合束縛が2次元であることがスピン偏極を実現する上で大きな利点になる。本論文では，まず次節で軸チャネリング電子の束縛状態を記述し，3節で円偏光による電子のスピン偏極過程を詳しく説明する。また，4節では電子の光吸収をチャネリング放射の実験結果を使って半定量的に計算する。最後に5節で偏極電子検出の可能性について議論する。

2. 軸チャネリング電子の束縛状態

電子はチャネリング軸方向には光速に近い速度で運動するためディラック方程式で記述されるが，軸に垂直な面内の横運動（束縛運動）はシュレディンガー方程式で扱える。軸対称性をもつ2次元のポテンシャルを $U(r)$ とすれば，円筒座標 (r, θ) によるシュレディンガー方程式は

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0 \gamma} \nabla^2 + U(r) \right\} \psi(r, \theta) = E \psi(r, \theta) \quad (1)$$

となる。ここで m_0 は電子の静止質量， γ はローレンツ係数， E は横運動のエネルギーである。(1)式をさらに

$$V(r) = \gamma U(r), \quad (2)$$

$$E_R = \gamma E \quad (3)$$

と置いて書き直すと

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(r) \right\} \psi(r, \theta) = E_R \psi(r, \theta) \quad (4)$$

となる。この式は電子の静止系つまりチャネリング方向の速度を0にした系でのシュレディンガー方程式になる。波動関数の動径部分と角度部分は簡単に分離でき

$$\psi(r, \theta) = R(r) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\ell\theta} \quad (5)$$

となる。 $R(r)$ は方程式

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} + \left\{ \frac{2m_0}{\hbar^2} (E_R - V(r)) - \frac{\ell^2}{r^2} \right\} R = 0 \quad (6)$$

の解である。(6)式の ℓ は角運動量で $|\ell| = 0, 1, 2, \dots$ の値をとる。ここでポテンシャルの形を

$$V(r) = -\frac{K}{r} \quad (7)$$

と仮定すると、(6)式から動径関数と電子の静止系でみたエネルギー固有値が求まり⁽⁷⁾,

$$R_{n\ell}(r) = C_{n\ell} \rho^{|\ell|} e^{-\rho/2} L_{n+2|\ell|}^{2|\ell|}(\rho), \quad (8)$$

$$E_R(n\ell) = -\frac{m_0 K^2}{2\hbar^2 (n + |\ell| + 1/2)} \quad (9)$$

となる。(8)式で $C_{n\ell}$ は規格化定数、 $L_{n+2|\ell|}^{2|\ell|}(\rho)$ はラゲールの陪多項式、

$$n = 0, 1, 2, \dots,$$

$$\rho = \alpha r,$$

$$\alpha = \frac{2m_0 K}{\hbar^2 (n + |\ell| + 1/2)}$$

である(註1参照)。(7)式のパラメータ K はチャネリング軸と角運動量に依存する量である。また、(2)式からわかるようチャネリングエネルギーの増加とともに、 K は r に比例して大きくなる。つまり、ポテンシャルはそれだけ深くなって行くわけである。それに対応して静止系でのエネルギー固有値 $E_R(n\ell)$ の絶対値もチャネリングエネルギーとともに大きくなる。

なお、各エネルギー状態は、 $N = n + |\ell| + 1$ とおいた $(N, |\ell|)$ の組

合わせにより原子と同様 $1s, 2s, 2p, 3s, \dots$ で表記する。

3. 電子のスピン偏極過程

前節で述べたように電子はチャネリング軸に垂直な平面内に束縛されているので、その角運動量は軸方向（これを量子化軸にとる）に平行かあるいは反平行になる。つまり、 $\vec{\ell} = (0, 0, \pm|\ell|)$ と書ける。ここで、スピン軌道相互作用

$$H_{so} = \frac{\hbar^2}{2m_0 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{\ell} \cdot \vec{s} \quad (10)$$

を考慮すると、各角運動量に対応するエネルギー状態は一部縮退がとけ、2つの状態に分裂する。(10)式で c は光速、 \vec{s} はスピンベクトルである。たとえば、 $2p$ 状態 ($\ell = \pm 1$) を考えるとその分裂の仕方は図1に示すようになる。ここで、ケット $|m_s, \ell\rangle$ は量子化軸方向のスピン成分 $m_s (= \pm \frac{1}{2})$ と角運動量 ℓ （これは量子化軸方向の成分しかもたない）をもつ各 p 状態を表わしている。 ΔE_{so} はスピン軌道相互作用エネルギーである。分裂のようすは、3次元球対称ポテンシャルをもつ普通の原子の場合とは幾分異なっている。 $|+\frac{1}{2}, 1\rangle$ と $|-\frac{1}{2}, -1\rangle$ が縮退し、 $|-\frac{1}{2}, 1\rangle$ と $|+\frac{1}{2}, -1\rangle$ が縮退しているのは(10)式より明らかであろう。ここで注意すべきことは、 $\ell = 1$ と $\ell = -1$ 状態がそれぞれ純粋スピン状態に分れることである。これは、2次元運動の結果であり、原子のスピン状態と異なる点である。

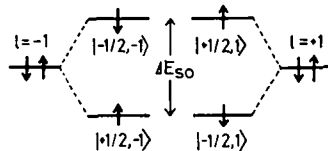


図1 2次元 p 状態のスピン軌道相互作用による分裂。 $\uparrow(\downarrow)$ は量子化軸に平行（反平行）なスピンを表わす。 $|m_s, \ell\rangle$, ΔE_{so} については本文参照。

さて、次に円偏光に対する双極子遷移の選択則を考えてみよう。光の伝搬方向を量子化軸方向にとると、右円偏光では $\Delta\ell = +1$ 、左円偏光では $\Delta\ell = -1$ となる。この選択則は、円筒座標で表わした電子の波動関数の角度部分 (5式参照) と、電子と円偏光の相互作用ハミルトニアン の形から明らかである。そこでもし基底 $1s$ 状態 ($\ell = 0$) にある電子を右円偏光で励起すると、吸収される光のエネルギーに応じて $2p$ 状態の $|+\frac{1}{2}, 1\rangle$ か $|-\frac{1}{2}, 1\rangle$ に電子は遷移する (図1参照)。このとき励起されたチャネリング電子は、上向きスピンまたは下向きスピンに完全に偏極することになる。

ここで $2p$ 状態の ΔE_{so} を求めてみよう。これは (10式) の期待値によって与えられ、

$$\begin{aligned}\Delta E_{so} &= \langle H_{so} \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2m_0 c^2} \int \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \{R_{2p}(r)\}^2 r dr\end{aligned}\quad (11)$$

となる。一例として、参考文献(5)の $\text{Si}\langle 110 \rangle$ 軸に 3.81MeV の電子をチャネリングさせた場合を考えてみよう。このとき、電子の静止系における $2p$ 状態のエネルギー固有値は $E_R(2p) \simeq -280\text{eV}$ となる (参考文献(5)の図2参照)。この値を前節の(9式)に代入すると K が求まり、(11式)が計算できる。その結果、 3.81MeV 電子 $\rightarrow \text{Si}\langle 110 \rangle$ 軸では ΔE_{so} は 1eV 程度になる。

4. 電子の光吸収

以上でチャネリング電子の偏極過程を説明したが、本節では結晶内の電子による光吸収を考えてみる。電子1個当たり吸収される光子の数は

$$N = \frac{e^2 \omega_R^3}{2\pi c^3 \hbar} |r_{1s2p}|^2 nt \quad (12)$$

で与えられる。ここで、 e は電子の電荷、 $\hbar\omega_R$ は静止系における遷移エネルギー、 r_{1s2p} は $1s$ と $2p$ 状態間の動径行列要素、 t は電子が結晶内に滞

在する時間, n はその間に電子と相互作用する光子の数である。今問題にしているチャネリング条件では, $1s-2p$ 遷移の場合 $\hbar\omega_R \simeq 320 \text{ eV}^{(5)}$, $|r_{1s2p}| \simeq 0.1 \text{ \AA}$ になる。また, 実験室系で考えると $1s-2p$ 遷移を引き起こす光のエネルギー $\hbar\omega_L$ はドップラー効果

$$\hbar\omega_R = \gamma(1 - \beta)\hbar\omega_L \quad (13)$$

によって数 KeV (X線領域) まで大きくなる。ここで, $\beta = v/c$, v は電子の速度のチャネリング軸方向の成分である。

さて, 光源としてシンクロトロン軌道放射 (SOR)⁽⁸⁾ の数 KeV 領域での最適値 (光子の数/秒 $\simeq 10^{13}$ 個) を用いると, (12) 式の概算から電子 1 個当り吸収される光子の数は $N \simeq 10^{-7}$ 個となる。この値は, チャネリング電子の $2p-1s$ 放射収量とはほぼ同程度である^(4,5)。なお, 結晶の厚さは $1 \mu\text{m}$ に仮定した。

5. おわりに

本稿で考察した円偏光によるチャネリング電子のスピン偏極でもっとも重要な点は, 純粋スピン状態の実現, つまり励起された電子は 100% 偏極することである。これは, 3 節でも議論したように, 電子の束縛が 2 次元で起きていることに起因する。 $|\ell\rangle$ によって指定される電子のエネルギー状態ではそれぞれ角運動量が量子化軸に平行, 反平行の 2 つの状態 ($\pm|\ell\rangle$) が縮退している。ところで, 円偏光した光も伝播方向 (量子化軸) に平行または反平行の決った角運動量 ($= \pm 1$) をもつので, 光吸収によって励起した電子は光からその角運動量を受け継ぎ, 縮退しているどちらか一方の状態へだけ遷移する。それは, 光子と電子との間で相互作用を通じて角運動量が保存されるからに他ならない。ところで, スピン軌道相互作用を考えると, これも 2 次元の束縛状態の特有性から $+|\ell\rangle$ と $-|\ell\rangle$ の状態はそれぞれ上向き, 下向きスピンの縮退が完全に解ける。このように, 光の

偏り状態と2次元束縛状態の電子のスピン軌道相互作用が結合して、励起されたチャネリング電子が偏極するわけである。

さて実際には束縛状態間のさまざまな遷移やチャネリング軌道から電子がはずれることなどによって、正味の偏極は減少することが考えられるかもしれない。しかし、4節で計算したように光吸収は放射収量と同程度の値をもつので、電子の入射条件を調節して、考えている遷移の初期状態にうまく入るようにすれば偏極電子を観測することが期待できる。また、本稿では偏極過程を説明する上で最も簡単な $1s-2p$ 遷移を例にとったが、純粋スピン状態が得られることはどの ℓ についても同じであるので、選択則を満たす寿命の長い束縛状態の組み合わせを調べることも必要であろう。

註1. 動径関数とエネルギー固有値

動径関数 $R(r)$ とエネルギー固有値 E_R は水素原子の場合と同様にして導出できる。 E_R は負であるから $E_R = -|E_R|$ とおくと、(6), (7)式より

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} + \left\{ \frac{2m_0}{\hbar^2} (-|E_R| + \frac{K_-}{r}) - \frac{\ell^2}{r^2} \right\} R = 0 \quad (A1)$$

となる。ここで $\rho = \alpha r$, $\alpha^2 = \frac{8m_0}{\hbar^2} |E_R|$, $\lambda = \frac{K}{\hbar} \left(\frac{m_0}{2|E_R|} \right)^{1/2}$ とおくと

(A1) 式は

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{\ell^2}{\rho^2} \right) R = 0 \quad (A2)$$

と変形される。次に $R(\rho) = f(\rho)e^{-\rho/2}$ において (A2) 式に代入すると

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} + \left(\frac{1}{\rho} - 1 \right) \frac{df}{d\rho} + \left(\frac{\lambda - 1/2}{\rho} - \frac{\ell^2}{\rho^2} \right) f = 0 \quad (A3)$$

を得る。さて $f(\rho)$ を

$$f(\rho) = \rho^{-1/2} (a_0 + a_1 \rho + a_2 \rho^2 + \dots) \equiv \rho^{-1/2} L(\rho) \quad (A4)$$

と定義すると $L(\rho)$ は、

$$\rho \frac{d^2 L}{d\rho^2} + \left\{ (2\ell+1) - \rho \right\} \frac{dL}{d\rho} + \left(\lambda - |\ell| - \frac{1}{2} \right) L = 0 \quad (\text{A5})$$

を満足する。一方、(A4)式の級数展開を(A3)式に代入すると、級数の係数の間には

$$a_{\nu+1} = \frac{\nu + |\ell| + 1/2 - \lambda}{(\nu+1)(\nu+2+|\ell|+1)} a_{\nu} \quad (\text{A5})$$

の漸化式が成り立つ。ところで、 $\rho \rightarrow \infty$ で R が有限におさまるには L が有限項で終らねばならない。そのために(A5)は式より

$$\lambda = n + |\ell| + 1/2 \quad (\text{A6})$$

を満足する0または正整数 n が存在しなければならない。したがって(A6)式よりエネルギー固有値は

$$E_R = -|E_R| = -\frac{m_0 K^2}{2\hbar^2 (n + |\ell| + 1/2)^2} \quad (\text{A7})$$

また係数 α は

$$a = \frac{2m_0 K}{\hbar^2 (n + |\ell| + 1/2)} \quad (\text{A8})$$

となる。最後に(A6)式を(A5)式に代入すると、 L はラグールの陪多項式 $L_{n+2|\ell|}^{2|\ell|}(\rho)$ となることがわかる。

参考文献

- (1) M. A. Kumakhov, Phys. Lett. **57**, 17 (1976)。
- (2) たとえば M. J. Alguard et al., Phys. Rev. Lett. **42**, 1148 (1979)。
- (3) チャネリング放射光の応用については, R. Wedell, phys. stat. sol.(b) **99**, 11(1980)に詳しい解説がある。
- (4) J. U. Andersen and E. Laegsgaard, Phys. Rev. Lett. **44**, 1079 (1980)。
- (5) N. Cue et al., Phys. Lett. **80A**, 26 (1980)。
- (6) U. Fano, Phys. Rev. **178**, 131 (1969)。また J. Kessler, *Polarized Electrons* 125 (Springer-Verlag, 1975) に詳しい説明がある。
- (7) K. Komaki and Fujimoto, Phys. Lett. **49A**, 445 (1974)。
- (8) 円偏光シンクロトロン放射を用いた実験としては, 真空紫外領域 (エネルギー 約12~13eV) で Xe 原子から偏極電子を光電離する U. Heinzmann et al., J. Phys. B **12**, L679 (1979) の報告がある。